



TITLE:

Siの(100)面n型表面量子化状態の  
valley-orbit相互作用(「Theory of  
Excitations on Ideal Surfaces」 報告  
,基研短期研究会)

AUTHOR(S):

大川, 房義

---

CITATION:

大川, 房義. Siの(100)面n型表面量子化状態のvalley-orbit相互作用(「Theory of Excitations on Ideal Surfaces」 報告,基研短期研究会). 物性研究 1975, 23(6): D18-D19

ISSUE DATE:

1975-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88934>

RIGHT:

「Si の (100) 面 n 型表面量子化状態の  
valley-orbit 相互作用」

東大理 大 川 房 義

従来, Multi-valley 有効質量近似は1バンドの視点で扱われているが, その定式化にはいささか疑問がある。Multi-valley 構造は本質的に Multi-band 構造で扱う必要がある。一般の場合を実際に計算できる形に定式化するのは難かしいが, Si の (100) 面の表面量子化状態の場合は, 6つの同等な谷のうち, 表面垂直方向に長く伸びた2つの谷が基底サブバンドとなり, 他の谷が無視でき, 考えるべき2つの谷はX点の回りの  $k \cdot p$  ハミルトニアンで表現できるので容易に扱うことができる。 $k = (0, 0, z\pi/a)$  の回りでの  $k \cdot p$  ハミルトニアンは,  $X_1$  の2つの状態をベースとして

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} (1+L+M) k_{11}^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (1+N) (k_z - k_o)^2, & \frac{\hbar^2}{2m} 2L k_x k_y + \Xi_u^1 e_{xy} \\ \frac{\hbar^2}{2m} 2L k_x k_y + \Xi_u^1 e_{xy}, & \frac{\hbar^2}{2m} (1+L+M) k_{11}^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (1+N) (k_z + k_o)^2 \end{pmatrix}$$

ここで  $L, M, N$  は他の  $X_4, X_3, X_1$  からの寄与で  $1+L+M = (0.190)^{-1}$ ,  $1+N = (0.916)^{-1}$ ,  $L > 0, M < 0$ ,  $k_o = \frac{2\pi}{a} \times 0.15$  ( $a$ ; 格子定数),  $\Xi_u^1 \approx 10$  eV である。対角成分にある  $e_{ii}$  に比例した項はエネルギー原点を変えるだけだから除いた。表面状態を考えるには次の波動方程式を考えればよい。

$$(\tilde{H} + V(Z)) \vec{\Psi}(lr) = \epsilon \vec{\Psi}(lr)$$

valley-orbit splitting の量を推定するため  $Z$  方向の抱絡関数として次を仮定する。

$$\Psi_1(Z) = \sqrt{\frac{b^3}{2}} e^{-\frac{b}{2}Z + ik_o Z}$$

$$\Psi_2(Z) = \sqrt{\frac{b^3}{2}} e^{-\frac{b}{2}Z - ik_o Z}$$

$$b = \sqrt[3]{\frac{4m_z F}{3\hbar^2}} \quad ; \quad m_z = \frac{m}{1+N}$$

すると、分離 $\Delta$ は次で与えられる。

$$\Delta \approx 0.38 (cm/eV) \times \sqrt{(\hbar\omega_c^*)^2 + (Z\mathcal{E}_u^1 e_{xy})^2} \cdot F \cdot 10^{-7}$$

ここで  $F \approx 10^6 \text{ eV/cm}$ ,  $\sqrt{(\hbar\omega_c^*)^2 + (Z\mathcal{E}_u^1 e_{xy})^2} \approx 10 \text{ meV}$  を入れれば,  $\Delta \approx 0.38 \text{ meV}$  を得る。一方実験で, レベル巾  $1 \text{ meV}$  程度の試料で分離が観測されることから, 現実には  $1 \text{ meV}$  以上あると思われる。しかし, 先に安藤らが報告しているように, 反転層内で交換相互作用による  $g$  値の enhancement と同じ機構がこの valley-orbit 分離にも同じく効くはずで, 現実には強磁場で  $N=0, 1$  のラングムアレベルのみ分離が観測されている事実は, 交換相互作用を示唆する。

#### 参 考 文 献

- (1) T. Ando and Y. Uemura : J. Phys. Soc. Japan 37 (1974) 1044